

***Ab initio* исследование структурных, электронных и магнитных свойств гетероструктур на основе сегнетоэлектрика и антиферромагнетика**

И.И. Гумарова^{1,2}, Д.А. Таюрский², Р.Ф. Мамин^{1,2}

¹Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского ФИЦ Казанский научный центр РАН, 420029 Казань, Россия

²Казанский (Приволжский) федеральный университет, 420008 Казань, Россия
e-mail: i.piyanzina@gmail.com

Привычные нам современные носители информации, например, жёсткие диски, состоящие из чередующихся немагнитных и магнитных слоёв, отличаются достаточно низкой скоростью чтения/записи, высоким потреблением энергии и слабой термостойкостью. Альтернативным подходом в создании подобных устройств является использование магнитоэлектронной связи в мультиферроидных материалах, с помощью которой можно было бы осуществлять электрическую запись магнитных битов с чрезвычайно низким энергопотреблением. Однако, сегнетоэлектричеству и ферромагнетизму трудно сосуществовать в однофазных материалах, поэтому до сих пор не удалось найти стабильный однофазный мультиферроик, в котором можно было бы полностью переключать намагниченность. В таких условиях искусственные гетероструктуры, состоящие из материалов, резко отличающихся по своим свойствам, – это идеальная платформа для непосредственного объединения различных физических свойств между соседними слоями или создания новых физических свойств, таких как магнитоэлектрическая связь, сверхпроводимость, двумерная проводимость, мультиферроичность, колоссальное магнитосопротивление и другие [1-3].

Активное изучение гетероструктур на основе оксидов переходных металлов началось с открытия квази-двумерного электронного газа на границе раздела двух неполярных и немагнитных широкозонных диэлектриков LaAlO_3 (LAO) и SrTiO_3 (STO) в 2004 [1]. Самой популярной причиной возникновения проводящей фазы в этой системе принято считать электронные перестройки, возникающие вследствие структурных искажений в разнозаряженных слоях $(\text{AlO}_2)^-$ and $(\text{LaO})^+$. Однако, перераспределение электронов в гетероструктуре может быть также инициировано присутствием сегнетоэлектрической поляризации. Так, было показано, что использование сегнетоэлектрика, например, BaTiO_3 , слои которого электронейтральны в отличие от LaAlO_3 , также может привести к возникновению проводящего интерфейса [4, 5].

Ранее нами теоретически предсказана [6] и экспериментально обнаружена проводимость в гетероструктуре из антиферромагнетика LaMnO_3 и сегнетоэлектрика BaTiO_3 ($\text{Ba}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{TiO}_3$) [7]. В рамках настоящего доклада будут представлены результаты *ab initio* моделирования структурных, электронных и магнитных свойств гетероструктуры $\text{LaMnO}_3/\text{BaTiO}_3$, содержащей различное количество слоёв сегнетоэлектрика. Будет представлено влияние направления и величины сегнетоэлектрической поляризации на вышеперечисленные свойства, рассмотрены послойные спектры плотности состояний, проанализирован вклад электронов различных орбиталей в проводимость.

Исследование выполнено за счет Российского научного фонда (проект № 21-12-00179).

1. S. Acharya, et al., *Mater. Lett.* **64**, 415 (2010).
2. M. An, et al., *S. Phys. Rev. B* **96**, 235112 (2017).
3. C. Aruta, et al., *Phys. Rev. B* **80**, 140405R (2009).
4. M.K. Niranjana, Y. Wang, S.S. Jaswal, E.Y. Tsymlal, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 016804 (2009).
5. K.D. Fredrickson, A. Demkov, *Phys. Rev. B* **91**, 115126 (2015).
6. D.P. Pavlov, et al., *JETP Lett.* **106**, 7 (2017).
7. V.V. Kabanov, et al., *Mater. Res. Express* **7**, 5 (2020).